

Титоров Д.Б.
Физико-технический институт УрО РАН,
г. Ижевск
titorovdb@mail.ru

АТОМАРНЫЕ МЕХАНИЗМЫ СТРУКТУРНЫХ ИЗМЕНЕНИЙ В СПЛАВАХ ЖЕЛЕЗА С УГЛЕРОДОМ

Железо и его сплавы в начале третьего тысячелетия остаются актуальными для практического использования и весьма интересны с научной точки зрения. К настоящему времени решены многие проблемы количественного описания, например, фазовых диаграмм, кристаллографии, широкого спектра свойств сталей и металлографических структур. Но при этом, как отмечалось в широко известной среди металловедов в 80–90-е гг. прошлого столетия монографии [1], «не существует полностью удовлетворительного объяснения фазового $\gamma \rightarrow \alpha$ превращения железа». Те же слова характеризуют ситуацию и в начале второго десятилетия XXI в. В настоящей работе механизмы структурных изменений при $\gamma \leftrightarrow \alpha$ превращениях углеродистых сталей рассматриваются на атомарном уровне с привлечением комбинированной модели атомов и правила парного взаимного проникновения автора [2, 3].

Каждый атом в конденсированном веществе занимает область пространства, радиус которой складывается из радиуса атома и амплитуды его колебаний $R_{at}^{os} = R_{at} + f$. Соответственно, размер области, занимаемой внутренними электронами, – $R_{atin}^{os} = R_{atin} + f$. При изменении температуры значение f меняется. Соответственно меняется отношение $(R_{atin} + f)/(R_{at} + f)$.

При отношении $(R_{atin} + f)/(R_{at} + f) = 0,634$ колеблющиеся атомы в соответствии с правилом парного взаимного проникновения упаковываются таким образом, что их центры формируют ОЦК решетку (рис. 1а) а при отношении $(R_{atin} + f)/(R_{at} + f) = 0,732$ центры колеблющихся атомов занимают узлы ГЦК решетки (рис. 1б) [2, 3].

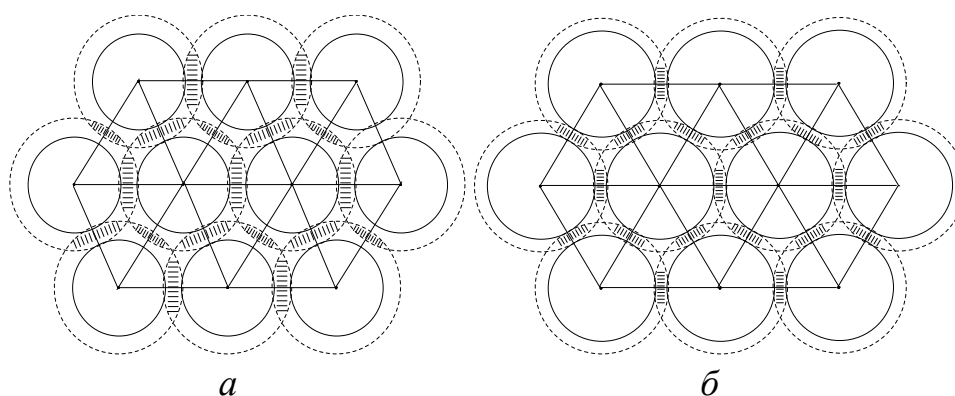


Рис. 1. Упаковка парно взаимно проникающих атомов при разных отношениях $(R_{\text{atin}} + f)/(R_{\text{at}} + f)$: *a* – $(R_{\text{atin}} + f)/(R_{\text{at}} + f) = 0,634$, решетка ОЦК, плоскость (110); *б* – $(R_{\text{atin}} + f)/(R_{\text{at}} + f) = 0,732$, решетка ГЦК, плоскость (111)

Следовательно, $\alpha \leftrightarrow \gamma$ превращения в железе можно связать с изменением амплитуды колебаний атомов при изменении температуры.

Центр октаэдрической поры α -Fe (рис. 2*a*) занят областью парного проникновения (атомов 5 и 6 на рис. 2*б*). Поэтому атом углерода не может внедриться в октаэдрическую пору феррита. Углерод не мог бы растворяться в феррите, если бы не было решеточных дефектов.

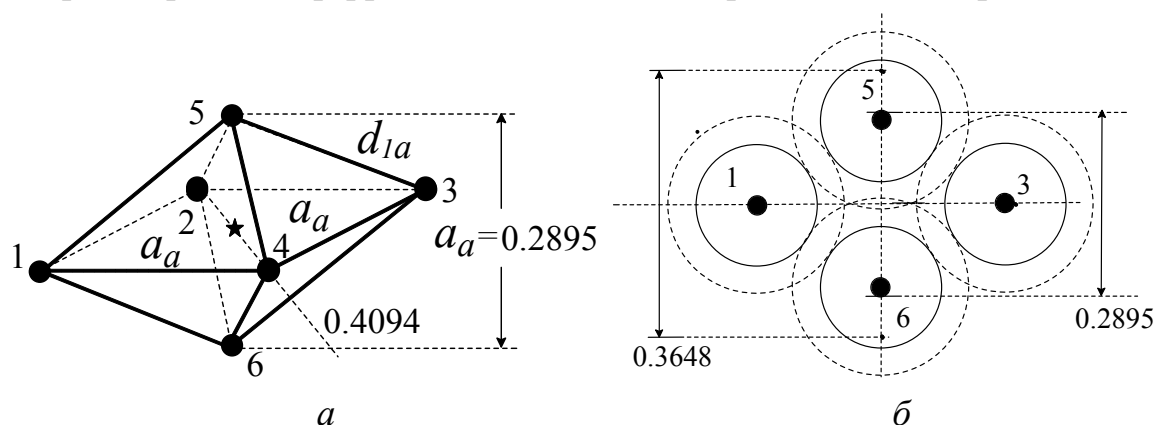


Рис. 2. *a* – октапора в ОЦК решетке феррита; *б* – область парного взаимного проникновения между атомами 5 и 6

В октаэдрических порах γ -Fe (рис. 3*a*) между областями внутренних электронов атомов железа расстояние немного меньше, чем диаметр атомов углерода (рис. 3*б*). Чтобы в октапоре γ -Fe мог поместиться атом углерода, атомы железа должны немного раздвинуться (рис. 3*в*).

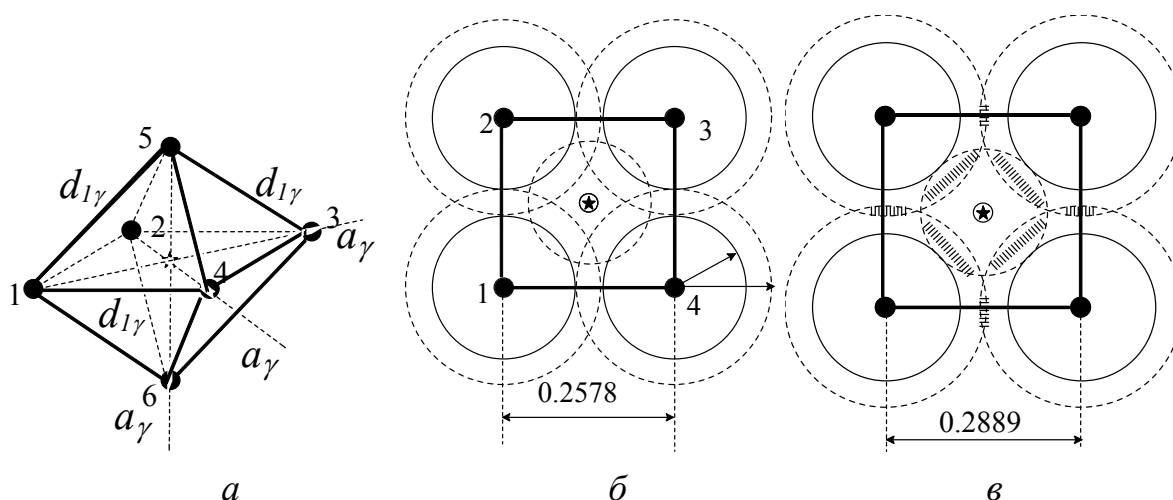


Рис. 3. Внедрение в октаэдрическую пору аустенита атома углерода. На рис. 3в заштрихованы области парного взаимного проникновения (ОПВП) оболочек внешних электронов атомов.

При медленном охлаждении смещения атомов углерода при диффузии в аустените направлены в области γ -решетки, растянутые атомами углерода. В обогащенных углеродом местах формируется цементит, а в освободившихся от углерода областях аустенита в результате $\gamma \rightarrow \alpha$ превращения образуется феррит. Такие атомарные процессы происходят при формировании феррито-карбидной смеси разной степени дисперсности в зависимости от состава и условий обработки.

Если сплав охлаждается быстро, то смещения атомов железа, необходимые для перестройки $\gamma \rightarrow \alpha$, затруднены. Ядра атомов углерода притягивают к себе купола оболочек атомов железа, которые проникли в оболочку атомов углерода, с большей силой, чем взаимно проникшие атомы железа притягиваются между собой. Поэтому атомы углерода удерживают атомы железа в позициях, близких к их позициям в исходной решетке аустенита. Тем самым обеспечивается сохранение участков остаточного аустенита, которые при новом нагреве могут служить центрами – зародышами восстановления исходной структуры аустенита.

Атомы углерода увеличивают расстояние между примыкающими к ним, атомами железа (рис. 3в), до значений, близких к межатомному расстоянию вдоль тетрагональной оси будущего мартенситного кристалла. При закалке ближайшие к растянутым ребрам октаэдрических ячеек аустенита (например, ребру 5-3 на рис. 4а) атомы железа смещаются в направлениях, перпендикулярных к этим ребрам. Так как в результате парного проникновения все атомы связаны между собой, смещения последующих атомов происходят направленно и эстафетным механизмом.

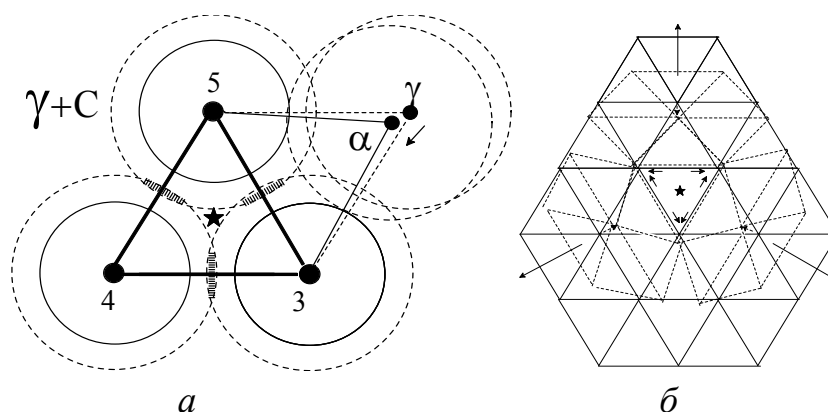


Рис. 4. Смещения атомов железа при мартенситном превращении

Направленность эстафетных смещений атомов в потенциальные узлы другой фазы (хотя направление смещения у каждого из атомов свое) обеспечивает определенность углов между мартенситными кристаллами, рис. 4б, ориентационные соотношения типа Курдюмова-Закса и Нешияма, и большую скорость мартенситного превращения.

Список источников

1. Физическое металловедение : в 3-х т. – 3-е изд. / пер. с англ. под ред. Р. У. Канна, П. Хаазена. М.: Металлургия 1987. Т. 2. Глава 18 «Физическое металловедение сталей». С. 495.
2. Титоров Д.Б. Формирование плоских и пространственных структур из сферических тел с взаимопроникающими оболочками // Кристаллография. 2001. № 1. С. 25–27.
3. Титоров Д.Б. Самоорганизация атомов в наноструктуры // Материаловедение. 2011. № 12. С. 2–11.